МЕХАНИКА ЖИДКОСТИ, ГАЗА И ПЛАЗМЫ / MECHANICS OF FLUIDS, GAS AND PLASMA

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.157

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОТЕЧЕНИЙ ГАЗА

Научная статья

Михеева В.М.[1,] *, Токманцев В.И.[2]

[1, 2] Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (mikheevavera01[at]gmail.com)

Аннотация

В работе рассмотрено численное моделирование нестационарного истечения газа через микроскопическое отверстие в пространство, заполненное равновесным газом с учетом эффектов сильной неравновесности и разреженности.

Кинетическое уравнение Больцмана для функции распределения в форме БГК решается методом дискретных скоростей. Интегрирование нестационарного уравнения по времени в пределах одного временного шага позволяет получить алгебраическую формулировку, представляющую процесс эволюции системы в виде последовательности перелетов и столкновений.

Основные результаты расчетов представлены в виде графических распределений, наглядно демонстрирующих ход течения микроструи в зависимости от параметра разреженности газа. Для моделирования используется среда программирования Compaq Visual Fortran.

Ключевые слова: микротечения газа, Уравнение Больцмана с моделью БГК-Шахова, метод дискретных скоростей, МЭМС.

NUMERICAL SIMULATION OF GAS MICROFLOWS

Research article

Mikheeva V.M.[1,] *, Tokmantsev V.I.[2]

[1, 2] Ural Federal University, Ekaterinburg, Russian Federation

* Corresponding author (mikheevavera01[at]gmail.com)

Abstract

The paper considers numerical simulation of unsteady gas flow through a microscopic hole into a space filled with an equilibrium gas, taking into account the effects of strong nonequilibrium and sparsity.

The kinetic Boltzmann equation for the distribution function in the form of BGC is solved by the method of discrete velocities. Integration of a non-stationary equation in time within one time step allows us to obtain an algebraic formulation representing the process of evolution of the system in the form of a sequence of flights and collisions.

The main results of calculations are presented in the form of graphical distributions that clearly demonstrate the course of the microjet flow depending on the gas rarefaction parameter. The Compaq Visual Fortran programming environment is used for modeling.

Keywords: micro-flows of gas, gas outflow through the hole, microfluidics, Boltzmann equation with the BGC-Shakhov model, discrete velocity method, MEMS.

Введение

Микротехнологии и современные материалы открывают перед исследователями новые возможности, новые направления исследования. В области гидрогазодинамики сформировавшимся новым направлением является микрофлюидика – исследование течения жидкости и газа в микромасштабах. При проектировании и создании устройств, основанных на микротечениях различного направления, необходимо прежде всего знать законы течения жидкости и газа на микро- и наноуровне.

Технологическим применением микроструй является смешение газов и защита поверхностей от воздействия химически агрессивной или высокотемпературной среды, осуществление процесса охлаждения. В настоящее время наиболее интенсивно развиваются численные методы исследования микротечений, позволяющие детально понять природу течений в микросистемах [1], [2], [3]. При этом особенности течения газовой среды определяются числом Кнудсена Kn – отношением длины свободного пробега молекул газа λ к характерному размеру системы L:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1)$$

Для микротечений, когда характерный размер системы L сравним с длиной свободного пробега λ, число Кнудсена $Kn \geq 1$, нарушаются условия применимости модели сплошной среды, и уравнения Навье-Стокса не работают должным образом. В данном случае для описания системы необходимо использовать кинетическое уравнение Больцмана [4].

В работе рассматривается нестационарное истечение газа через отверстие в пространство, заполненное равновесным газом с учетом эффектов сильной неравновесности и разреженности.

Постановка задачи

Рассмотрим цилиндрическую расчетную область пространства высотой H и радиусом R вблизи отверстия радиусом $R_0 \ll R$ в твердой стенке, через которое происходит истечение газа (рис. 1). Ось цилиндра z совпадает с центром отверстия O.

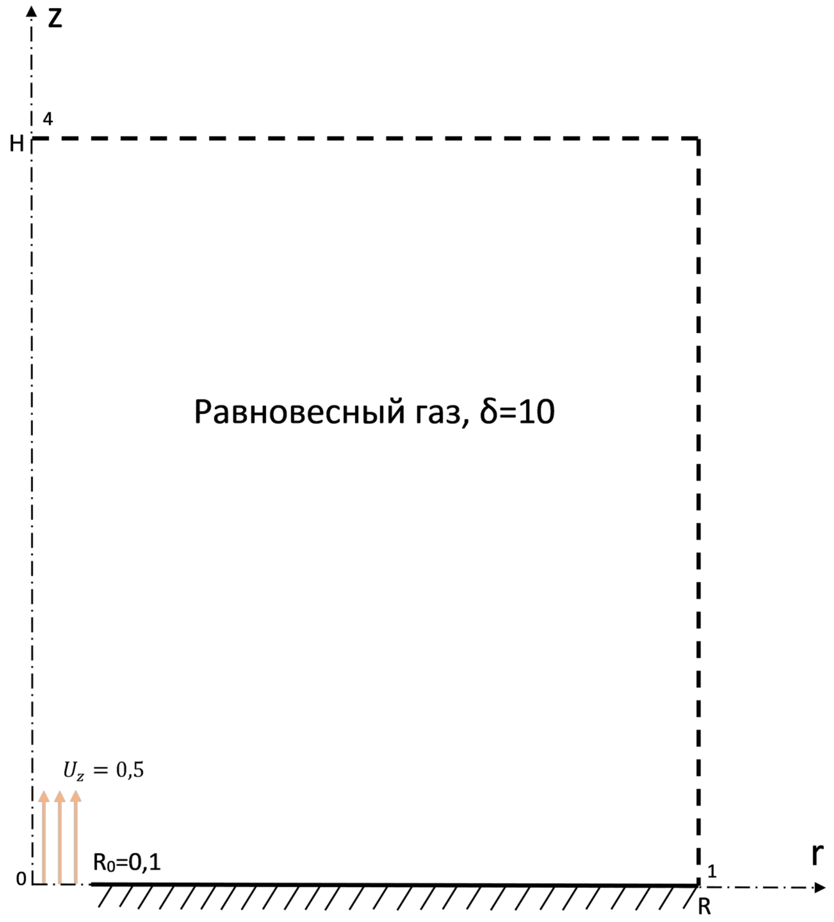

Рисунок 1 - Схематичное представление задачи

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.157.1

Предполагается, что в начальный момент времени расчетная область заполнена равновесным газом, состояние которого характеризуется параметром разреженности:

$$\delta = \frac{PR}{\mu v_m} \sim 1/Kn \tag{2}$$

где P – давление, – коэффициент вязкости, $v_m = \sqrt{2kT/m}$ – наиболее вероятная скорость газовых молекул массой m при температуре T.

Граничные условия:

1. Снизу расчетная область ограничена твердой стенкой с микроотверстием. На непроницаемой поверхности стенки для функции распределения задаются условие диффузного рассеяния. Верхняя и боковая границы – проницаемы для молекул газа, при этом функция распределения для влетающих в расчетную область молекул принимается локально-равновесной. Функция распределения вылетающий молекул на этих границах рассчитывается с помощью экстраполяции из объема.

2. В плоскости отверстия задается локальная-равновесная функция распределения с заданной средней скоростью истечения газа.

3. Температура на всех границах задана и поддерживается постоянной.

Исследуются различные режимы течения, соответствующие различным параметрам разреженности среды.

Методика расчета

3.1. Уравнение Больцмана

Нестационарное уравнение Больцмана позволяет найти функцию распределения, то есть определить плотность вероятности для частиц газа иметь определённые скорости в произвольный момент времени в любой точке пространства. В свою очередь знание функции распределения дает возможность вычислить все локальные макроскопические величины (плотность, температуру, среднюю скорость течения и др.) [5], [6], [7].

Простейшей моделью столкновений для уравнения Больцмана является модель Бхатнагара-Гросса-Крука (БГК) [8]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f = \frac{f^{eq} - f}{\tau} \tag{3}$$

где $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$ – функция распределения в точке пространства, $\vec{r}, \vec{v}$ – полная скорость частиц газа.

$f^{eq}(\vec{r}, \vec{v}, t)$ – локально-равновесная функция распреления, к которой стремится f в результате столкновений между частицами за характерное время релаксации τ ,

$$f^{eq} = \frac{n}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{c^2}{2RT}\right] \tag{4}$$

где $\vec{c} = \vec{v} - \vec{u}$ – собственная скорость частиц, $\vec{u}$ – средняя скорость потока, R – газовая постоянная, n – числовая плотность и T – температура,

$$n(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \tag{5}$$

$$n\vec{u}(\vec{r}, t) = \int \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \tag{6}$$

$$\frac{3}{2} nkT(\vec{r}, t) = \frac{m}{2} \int (\vec{v} - \vec{u})^2 f(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \tag{7}$$

3.2. Метод дискретных скоростей (DVM) [9]

В численном расчете необходимо дискретизировать как простанство координат $\overrightarrow{r_c}$, так и пространство скоростей $\overrightarrow{v_\alpha}, \alpha = (1, \ldots, M)$. Соответсвенно, уравнение Больцмкана для дискретных скоростей (DVBE) принимает вид:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \overrightarrow{v_\alpha} \cdot \nabla f_\alpha = \frac{f_\alpha^{eq} - f_\alpha}{\tau}, \alpha = 1, \ldots, M \tag{8}$$

где $f_\alpha = f\left(\vec{r}, \overrightarrow{v_\alpha}, t\right)$ – дискретная функция распределения вдоль направления дискретной скорости $\overrightarrow{v_\alpha}$.

Вместо интегралов для макропараметров можно записать квадратурные формулы:

$$n = \sum_\alpha w_\alpha f_\alpha \tag{9}$$

$$n\vec{u} = \sum_\alpha w_\alpha \overrightarrow{v_\alpha} f_\alpha \tag{10}$$

$$\frac{3}{2} nkT = \frac{m}{2} \sum_\alpha w_\alpha \left(\overrightarrow{v_\alpha} - \overrightarrow{u_\alpha}\right)^2 f_\alpha \tag{11}$$

где w_a – квадратурный вес.

Интегрирование уравнения Больцмана для дискретных скоростей по времени в течение одного временного шага Δt дает:

$$\bar{f} = f + \frac{\Delta t}{2\tau} \left(f^{eq} - f\right) \tag{12}$$

$$\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c}, t + \Delta t\right) = \frac{2\tau - \Delta t}{2\tau + \Delta t} \bar{f}\left(\overrightarrow{r_c} - \overrightarrow{v_\alpha}\Delta t, t\right) + \frac{2\Delta t}{2\tau + \Delta t} f^{eq}\left(\overrightarrow{r_c}, t + \Delta t\right) \tag{13}$$

где $\tau = \tau\left(\overrightarrow{r_c}, t + \Delta t\right)$ – характерное время столкновительной релаксации в центре рассматриваемой ячейки пространства в момент времени $t + \Delta t$.

Таким образом, на каждом временном шаге решение нестационарного уравнения Больцмана может быть приближенно представлено в виде двух последовательных процессов:

1. Процесс перелетов.

$$\bar{f}^* \left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right) = \bar{f}\left(\overrightarrow{r_c} - \overrightarrow{v_\alpha}\Delta t, t\right) \tag{14}$$

2. Процесс столкновений.

$$\bar{f}\left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right) = \bar{f}^*\left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right) + \frac{2\Delta t}{2\tau + \Delta t}\left[f^{eq}\left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right) - \bar{f}^*\left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right)\right] \tag{15}$$

Здесь $\bar{f}^*\left(\overrightarrow{r_c}, t + \Delta t\right)$ – промежуточная функция распределения в центре пространственной ячейки $\overrightarrow{r_c}$ в момент времени $t + \Delta t$. Для того, чтобы получить функцию распределения $\bar{f}\left(\vec{r}_c, t + \Delta t\right)$, функции $\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c} - \overrightarrow{v_\alpha}\Delta t, t\right)$ и $f^{eq}\left(\overrightarrow{r_c}, t + \Delta t\right)$ должны быть определены заранее. $\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c} - \overrightarrow{v_\alpha}\Delta t, t\right)$ – это функции распределения в окружающих центрах соседних ячеек, которые могут быть получены с помощью интерполяционных методов:

$$\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c}-\overrightarrow{v_\alpha}\Delta t, t\right)=\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c}, t\right)-\Delta t\overrightarrow{v_\alpha}\cdot\nabla\bar{f}\left(\overrightarrow{r_c}, t\right) \tag{16}$$

Результаты и обсуждение

На рисунке 2 представлен результат истечения струи со скоростью $u_z=0,5v_m$ в область, заполненную газом при $\delta=10$, при этом $H/R=4, R_0/R=0,1$. Количество дискретных молекулярных скоростей $N_c=40$, количество дискретных азимутальных углов молекулярной скорости $N_f=11$, количество дискретных осевых углов молекулярной скорости $N_t=20$.

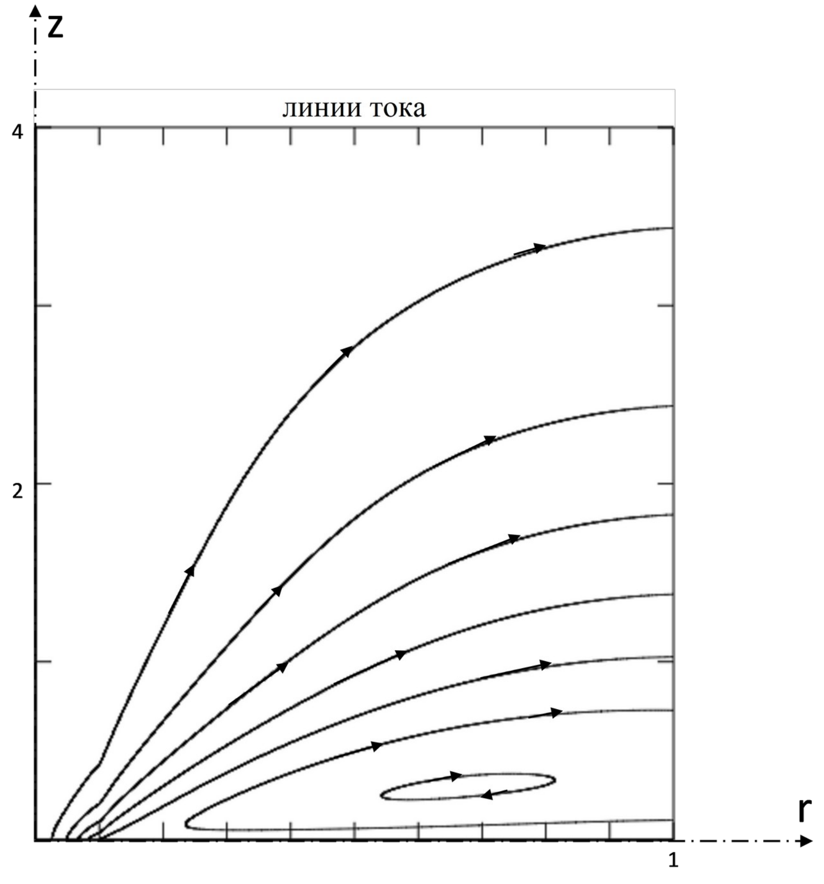

Рисунок 2 - Общий вид линии тока течения при t → ∞

DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.157.2

Представление поля течения в близи отверстия и приблизительный анализ числовых параметров показан на рисунке 3. Время расчётов данной представленной картины визуализации составил 100 часов.

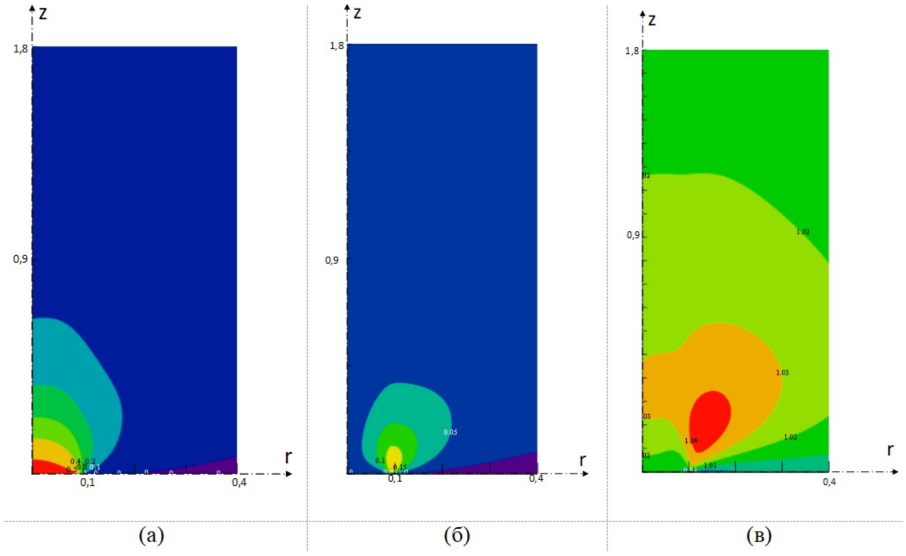

Рисунок 3 - Поле течения струи:
а – графики распределения азимутальной компоненты скорости;
б – графики распределения радиальной компоненты скорости;
в – графики распределения температуры
DOI: https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.143.157.3

Анализируя полученные графики, мы видим [10]:

1. Эффективному смешению газов способствует:

– максимальная скорость потока при невысоких температурах;

– увеличение температуры потока при уменьшении скорости истечения.

2. Охлаждению способствует уменьшение скорости теплового движения частиц, что приводит к снижению скорости распространения струи в пространстве.

Азимутальная скорость снижается с *0,5* до *0,1* в области $z \in [0; 0,7]$, поэтому наиболее интенсивное перемешивание при начальной скорости $\frac{U_z}{v_m} = 0,5$ наблюдается в области z = 0,7 и r = 0,2 (рисунок 3а). Радиальная скорость снижается с *0,5* до *0,15* в области периферии отверстия $z \in [0,05; 0,2]$ (рисунок 3б). Наблюдается зона возвратного течения (т.е. течения вдоль поверхности) со скоростью $\frac{U_z}{v_m} = -0,005$ в области от r = 0,2 (фиолетовые зоны графика 3а и 3б), что способствует охлаждению. Характерное увеличение температуры составляет 0,05%. Зона наибольшей температуры соответствует красной зоне на графике 3в $(z \in [0,1; 0,35], \quad r \in [0,1; 0,2])$ минимальная соответствует наиболее вероятной максвелловской температуре $\frac{T}{T_m} = 1$.

Заключение

Для большей интенсификации течения необходимо увеличивать скорости течения до сверхзвуковых.

Результаты расчетов течений в микроканалах свидетельствуют, что численное решение модельных кинетических уравнений может быть успешно использовано для моделирования стационарных и нестационарных внутренних течений.

Полученные результаты способствуют пониманию природы течений газа при различных скоростях и параметрах разреженности среды. Результаты исследований могут иметь значение для приложений, в которых встречаются течения газа: в аэрокосмической технике, при разработке МЭМС и многое другое.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Conflict of Interest

None declared.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.

Список литературы / References

1. Денис М. У. Шаг вперед на пути развития МЭМС-технологий в России: «Русская Ассоциация МЭМС» / М. У. Денис. — URL: chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.rusnor.org/upload/My/leon/mems.pdf (дата обращения: 22.03.2024).

2. Анискин В. М. Экспериментальное исследование микротечений жидкости и газа : автореф. на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / В. М. Анискин. — 2013.

3. Анискин В. М. Влияние размера сопла на дальнобойность сверхзвуковой микроструи / В. М. Анискин, А. А. Маслов, С. Г. Миронов // Письма в ЖТФ. — 2011. — Том 37. — № 22.

4. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана / К. Черчиньяни. — 1976.

5. Попов В. Н. Вычисление макропараметров разредженного газа в задаче о течении Куэтта методом дискретных скоростей / В. Н. Попов, Е. А. Латухина // Северный (Арктический) федеральный университет имени М. В. Ломоносова. — 2018. — № 4. DOI: 10.18384/2310-7251-2018-4-140-149

6. Yang L. M. Numerical simulation of flows from free molecular regime to continuum regime by a DVM with streaming and collision processes / L. M. Yang, C. Shu, J. Wu [et al.] // Journal of Computational Physics. — 2016. — Vol. 306. — Iss. C. — P. 291–310. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.11.043

7. Фролова А. А. Кинетические методы решения нестационарных задач со струйными течениями / А. А. Фролова, В. А. Титарев // Математика и математическое моделирование. — 2018. — № 4. — С. 27–44.

8. Bhatnagar P. L. A model for collision processes in gases. I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems / P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook // Physical Review. — Vol. 94. — P. 511–525.

9. Попов В. Н. Вычисление макропараметров разреженного газа в задаче о течении Куэтта методом дискретных скоростей / В. Н. Попов, Е. А. Латухина // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. — 2018.

10. Анискин В. М. Исследование устойчивости дозвуковой газовой микроструи / В. М. Анискин, Д. А. Бунтин, А. А. Маслов [и др.] // Журнал технической физики. — 2012. — Том 82. — № 2.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Denis M. U. Shag vpered na puti razvitija MJeMS-tehnologij v Rossii: «Russkaja Associacija MJeMS» [A step forward in the development of MEMS technologies in Russia: "Russian Association of MEMS"] / M. U. Denis. — URL: chrome-extension://efaidnbmnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.rusnor.org/upload/My/leon/mems.pdf (accessed: 22.03.2024). [in Russian]

2. Aniskin V. M. Jeksperimental'noe issledovanie mikrotechenij zhidkosti i gaza [Experimental study of micro-flows of liquid and gas] : abstract. for the degree of Doctor of Physical and Mathematical Sciences / V. M. Aniskin. — 2013. [in Russian]

3. Aniskin V. M. Vlijanie razmera sopla na dal'nobojnost' sverhzvukovoj mikrostrui [The influence of nozzle size on the range of a supersonic microjet] / V. M. Aniskin, A. A. Maslov, S. G. Mironov // Pis'ma v ZhTF [Letters in ZhTF]. — 2011. — Vol. 37. — № 22. [in Russian]

4. Cherchignani K. Teorija i prilozhenija uravnenija Bol'cmana [Theory and applications of the Boltzmann equation] / K. Cherchignani. — 1976. [in Russian]

5. Popov V. N. Vychislenie makroparametrov razredzhennogo gaza v zadache o techenii Kujetta metodom diskretnyh skorostej [Calculation of rarefied gas macroparameters in the Couette flow problem by the method of discrete velocities] / V. N. Popov, E. A. Latukhina // Severnyj (Arkticheskij) federal'nyj universitet imeni M. V. Lomonosova [Northern (Arctic) Federal University named after M. V. Lomonosov]. — 2018. — № 4. DOI: 10.18384/2310-7251-2018-4-140-149 [in Russian]

6. Yang L. M. Numerical simulation of flows from free molecular regime to continuum regime by a DVM with streaming and collision processes / L. M. Yang, C. Shu, J. Wu [et al.] // Journal of Computational Physics. — 2016. — Vol. 306. — Iss. C. — P. 291–310. DOI: 10.1016/j.jcp.2015.11.043

7. Frolova A. A. Kineticheskie metody reshenija nestacionarnyh zadach so strujnymi techenijami [Kinetic methods for solving nonstationary problems with jet flows] / A. A. Frolova, V. A. Titarev // Matematika i matematicheskoe modelirovanie [Mathematics and mathematical Modeling]. — 2018. — № 4. — P. 27–44. [in Russian]

8. Bhatnagar P. L. A model for collision processes in gases. I: Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems / P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, M. Krook // Physical Review. — Vol. 94. — P. 511–525.

9. Popov V. N. Vychislenie makroparametrov razrezhennogo gaza v zadache o techenii Kujetta metodom diskretnyh skorostej [Calculation of rarefied gas macroparameters in the Couette flow problem by the method of discrete velocities] / V. N. Popov, E. A. Latukhina // Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo oblastnogo universiteta. Serija: Fizika-Matematika [Bulletin of the Moscow State Regional University. Series: Physics-Mathematics]. — 2018. [in Russian]

10. Aniskin V. M. Issledovanie ustojchivosti dozvukovoj gazovoj mikrostrui [Stability study of subsonic gas microjet] / V. M. Aniskin, D. A. Buntin, A. A. Maslov [et al.] // Zhurnal tehnicheskoj fiziki [Journal of Technical Physics]. — 2012. — Vol. 82. — № 2. [in Russian]